

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ  
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΥ ΔΙΠΛΩΜΑΤΟΣ ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ

**Τίτλος**

«Μελέτη της Ατμοσφαιρικής Επίδρασης του  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$  (HFC-134a) και των Προϊόντων Αποικοδόμησης του, μέσω της Αντίδρασής του με Άτομα Χλωρίου»

Καλούδης Νικόλαος

Μεταπτυχιακός Φοιτητής

Τμήματος Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστημίου Κρήτης

Επιβλέπουσα καθηγήτρια Δρ. Κ. Βελώνια

**Τρίτη, 24/07/2018,**

**12:30 μ.μ.,**

**Αίθουσα Σεμιναρίων 307,**

**Κτίριο Τμήματος Χημείας,**

**Πανεπιστήμιο Κρήτης**

Στην παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή προσδιορίστηκαν ποιοτικά και ποσοτικά τα τελικά προϊόντα τροποσφαιρικής οξειδωσης του 1,1,1,2 Τετραφθοροαιθανίου ( $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$ , HFC-134a) και διερευνήθηκε διεξοδικά ο μηχανισμός της διαδικασίας. Το HFC-134a αποτελεί μέχρι και σήμερα την πιο ευρέως χρησιμοποιημένη ένωση της δεύτερης γενιάς εναλλακτικών των χλωροφθορανθράκων (CFC), ενώσεις με ποικίλες εφαρμογές στη βιομηχανία και στην καθημερινή ζωή. Οι εξαιρετικές φυσικοχημικές του ιδιότητες, το αμελητέο δυναμικό καταστροφής του στρατοσφαιρικού όζοντος (Ozone Depletion Potential) και το σημαντικά χαμηλότερο δυναμικό παγκόσμιας θέρμανσης (Global Warming Potential) του HFC-134a, σε σχέση με τους CFC οδήγησαν στην ευρεία χρήση του σε ποικίλες εφαρμογές, με σημαντικότερη τη χρήση του ως κυκλοφορητικό σε διάφορα

συστήματα ψύξης. Ωστόσο, η διεξοδική αποτίμηση των επιπτώσεων του HFC-134a, στην ποιότητα της Ατμόσφαιρας και το Κλίμα συμπεριλαμβάνει, πέρα από την άμεση επίδρασή του, την ποσοτικοποίηση των προϊόντων αποικοδόμησής του, κατά τον Τροποσφαιρικό κύκλο ζωής του (Full Life- Cycle Assessment, LCA), προκειμένου να αποτιμηθεί συνολικά η συνεισφορά του σε κρίσιμες περιβαλλοντικές διεργασίες, όπως η Κλιματική Αλλαγή και η Ποιότητα της Ατμόσφαιρας και των υδάτινων πόρων.

Στο συγκεκριμένο πλαίσιο, αρχικά μελετήθηκε η κινητική της αντίδρασής του HFC-134a με άτομα Cl σε θερμοκρασιακό εύρος 243 – 363 K και συνολική πίεση 700 Torr, ρυθμιζόμενη με μίγμα συνθετικού αέρα (80% N<sub>2</sub>, 20% O<sub>2</sub>). Ακολούθως, εκτιμήθηκε η απόδοση των κύριων τελικών προϊόντων οξειδωσης και προσδιορίστηκε η εξάρτησή της από την πίεση, 100 – 700 Torr, και τη θερμοκρασία, 243 – 363 K, χρησιμοποιώντας την τεχνική του Θερμοστατούμενου Φωτοχημικού Αντιδραστήρα (Thermostated PhotoChemical Reactor, TPCR) συζευγμένη με μετασχηματιζόμενη κατά Fourier Φασματοσκοπία Υπερύθρου (Fourier Transformed InfraRed Spectroscopy FT-IRS), για την σύγχρονη, in-situ, παρακολούθηση αντιδρώντων και προϊόντων. Επιλεγμένα πειράματα ποσοτικού προσδιορισμού των προϊόντων διεξήχθησαν, επίσης, με τη σύγχρονη προσθήκη οξειδίων του αζώτου (NO<sub>x</sub>), ώστε να προσομοιωθούν ατμοσφαιρικές συνθήκες ρυπασμένων περιοχών. Τα κύρια προϊόντα που ταυτοποιήθηκαν ήταν η υπερφθοριωμένη ακεταλδεΰδη (CF<sub>3</sub>C(O)F), η μονόφθορο- (HC(O)F) και η υπερφθοριωμένη (FC(O)F) φορμαλδεΰδη και για την ποσοτικοποίησή τους εφαρμόστηκε ο νόμος των Beer-Lambert. Ο ποσοτικός προσδιορισμός της απόδοσης της CF<sub>3</sub>C(O)F σε ατμοσφαιρικές συνθήκες αποτελεί τον βασικό στόχο της παρούσας διατριβής, καθώς αποτελεί πρόδρομη ένωση της ατμοσφαιρικής παραγωγής του, απροσδιόριστης ακόμα περιβαλλοντικής επίδρασης, τριφθορο-οξικού οξέος (CF<sub>3</sub>C(O)OH, TFA). Τα πειράματα που διεξήχθησαν συναρτήσκει της πίεσης κατέδειξαν ότι η εκατοστιαία απόδοση των προϊόντων, στο εύρος πιέσεων 300-700 Torr παρουσιάζει αμελητέα εξάρτηση από την παρουσία τρίτου σώματος, ενώ ιδιαίτερη έμφαση στην παρούσα εργασία δόθηκε στη μελέτη εξάρτησης της απόδοσης των κύριων τελικών σταθερών προϊόντων από τη συγκέντρωση O<sub>2</sub> και τη θερμοκρασία. Τα αποτελέσματα της συγκεκριμένης μελέτης κατέδειξαν την ύπαρξη δύο ανεξάρτητων, παράλληλων καναλιών παραγωγής προϊόντων. Όπως προσδιορίστηκε, η απόδοση

παραγωγής του  $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})\text{F}$  αυξάνει με μείωση της θερμοκρασίας και με αύξηση των επιπέδων  $\text{O}_2$ . Αντίθετα, το κανάλι παραγωγής που φέρεται να συνδέεται με την παραγωγή των  $\text{HC}(\text{O})\text{F}$  και  $\text{FC}(\text{O})\text{F}$  φαίνεται να έχει θετική θερμοκρασιακή εξάρτηση και αντίστροφη εξάρτηση από τη συγκέντρωση  $\text{O}_2$ . Τέλος, η παρουσία  $\text{NO}_x$ , όπως προέκυψε από τα πειραματικά δεδομένα φαίνεται να επηρεάζει άμεσα το κανάλι παραγωγής των  $\text{HC}(\text{O})\text{F}$  και  $\text{FC}(\text{O})\text{F}$ , οδηγώντας σε σημαντική αύξηση της απόδοσής τους, στο εύρος θερμοκρασιών που μελετήθηκε, μειώνοντας συγχρόνως την απόδοση παραγωγής  $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})\text{F}$ .